

Tartu, 17 marca 2012 r.

Dr Mikhail G. Brik

Profesor, Laboratorium Spektroskopii Laserowej,

Instytut Fizyki, Uniwersytet w Tartu

Riia 142, Tartu 51014, Estonia

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

AUTOREFERAT

1. Dane personalne

Mikhail G. Brik

[REDACTED]

[REDACTED]

2. Obecne miejsce pracy:

Instytut Fizyki, Uniwersytet w Tartu,

Riia 142, Tartu 51014, Estonia

Stanowisko: Profesor, Teoretyczne Badania Materiałowe

3. Stopnie i tytuły naukowe

2001 – Docent (Ministerstwo Edukacji Federacji Rosyjskiej)

1995 – Doktor (kandydat nauk fizycznych i matematycznych),

Państwowy Uniwersytet w Kubaniu, Krasnodar, Rosja.

Specjalizacja: fizyka ciała stałego, tytuł rozprawy doktorskiej: *Non-radiative*

transitions in impurity centers with strong electron-vibrational interaction,

Promotor: Prof. Dr. Sci. V.F. Pisarenko

1992 – magister fizyki, wydział Fizyki, Państwowy Uniwersytet w Kubaniu, Krasnodar, Rosja.

Specializacja: fizyka, tytuł: inżynier - fizyk.

Tytuł pracy dyplomowej: *Spectra of Cr⁴⁺ ions in Y₂SiO₅ and Y₃Al₅O₁₂ crystals*

Promotorzy: Profesorowie Nadzwyczajni Dr. A.G. Avanesov, V.V.

Zhorin, **Dyplom z wyróżnieniem.**

Wyróżnienie pierwszego stopnia na Rosyjskiej Studenckiej Konferencji Fizyki Optycznej, Tomsk, Maj 1991

Szkoła średnia: 1975 - 1985 – Szkoła Nr 48, *Chernoerkovskaya, region Slavyanski, Kraj Krasnodarski*, ukończona ze złotym medalem

4. **Zatrudnienie**

Luty 2009 – obecnie:	Profesor Teorii Badań Materiałowych, Laboratorium Spektroskopii Laserowej, Instytut Fizyki, Uniwersytet w Tartu, Estonia
lipiec 2008 – luty 2009:	Nadzwyczajny Starszy Specjalista – badacz, Laboratorium Spektroskopii Laserowej, Instytut Fizyki, Uniwersytet w Tartu, Estonia
lipiec 2007 – lipiec 2008:	Profesor zaproszony (wizytujący), Laboratorium Spektroskopii Laserowej, Instytut Fizyki, Uniwersytet w Tartu, Estonia
marzec 2003 – lipiec 2007	Zaproszony (wizytujący) fizyk, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Uniwersytet Kyoto, Kyoto, Japonia
lipiec 2005 – listopad 2007	Zaproszony (wizytujący) fizyk, Wydział Chemii, Uniwersytet Kwansei Gakuin, Sanda, Japnia
grudzień 2001 – grudzień 2002	Zaproszony (wizytujący) fizyk, Wydział Chemii Fizycznej, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Izrael

Październik 2000 – Grudzień 2001	Profesor nadzwyczajny (Associate), Wydział Fizyki, Uniwersytet W Asmarze Asmara, Erytrea
Marzec 1998 – Październik 2002	Profesor nadzwyczajny (Associate), Wydział Fizyki Ogólnej, Państwowy Uniwersytet w Kubaniu, Krasnodar, Rosja
Wrzesień 1997 – Marzec 1998	Starszy Wykładowca, Wydział Fizyki Ogólnej, Państwowy Uniwersytet w Kubaniu, Krasnodar, Rosja
Maj 1996 – Wrzesień 1997	Młodszy Adiunkt, Wydział Fizyki Eksperymentalnej, Uniwersytet w Kubaniu, Krasnodar, Rosja
Wrzesień 1992 – Listopad 1995	Post-Doc, Wydział Fizyki Eksperymentalnej, Uniwersytet w Kubaniu, Krasnodar, Rosja
September 1985 – June 1992	Student, Wydział Fizyki, Uniwersytet w Kubaniu, Krasnodar, Rosja (wliczając w to dwa lata obowiązkowej służby wojskowej od czerwca 1987 do czerwca 1989)

5. Publikacje naukowe

5.1. Całkowita liczba publikacji naukowych = **190** (168 wymienionych w bazie Web of Science), z tego 189 opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych. Całkowita liczba rozdziałów w książkach naukowych - **8** (wszystkie opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora). Artykuły były opublikowane w renomowanych międzynarodowych czasopismach naukowych, takich jak:

- **Journal of Physics: Condensed Matter** – 12 prac;
- **Physical Review B** – 3 prace;
- **Inorganic Chemistry** – 2 prace;
- **Journal of American Chemical Society** – 1 praca;
- **Journal of Applied Physics** – 3 prace;
- **Journal of Physics D: Applied Physics** – 5 prac;

5.2. Całkowity “impact factor” opublikowanych prac (na podstawie bazy danych Journal Citation Reports i stron internetowych odpowiednich czasopism; dane wzięte z roku opublikowania każdej pracy): 255.696

5.3. Liczba cytacji powyżej wymienionych prac (w/g Web of Science, 21.02.2012) = **823**.

Indeks Hirsch'a = **15**.

5.4. Wystąpienia konferencyjne, seminaria, podręczniki, i wydawnictwa podręcznikowe:

- 115 prezentacji na konferencjach międzynarodowych, w tym:
 - a) 20 prezentacji wygłaszanych (oral) (dwa referaty zaproszone), 19 prezentacji po uzyskaniu stopnia doktora;
 - b) 95 prezentacji plakatowych, w tym 91 prezentacji po uzyskaniu stopnia doktora;
- 14 zaproszonych seminariów w różnych instytucjach badawczych i uniwersytetach; wszystkie po uzyskaniu stopnia doktora.
- 5 skryptów akademickich (dwa opublikowane po rosyjsku, trzy po angielsku):
 - M.G. Brik, I.D. Bregeda, M.P. Matveyakin, "Methods of treatments of experimental results in physical laboratory" (in Russian), Krasnodar, Kuban State University, 1997. 73 strony.
 - M.G. Brik, I.D. Bregeda, M.P. Matveyakin, "Mechanics: problems with solutions" (in Russian), Krasnodar, Kuban State University, 2000. 112 stron.
 - M.G. Brik, S.S. Kotelnikov, M.Kahsay, "Physics 206: Electricity and Optics. Laboratory Manual", University of Asmara, Asmara, 2001. 56 stron.
 - M.G. Brik, S.S. Kotelnikov, "Kinematics: problems with solutions", University of Asmara, Asmara, 2001. 26 stron.
 - M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, "Introduction to spectroscopy of atoms, molecules and crystals", Tartu University Press, 2008, 234 strony.

6. Udział w lokalnych i międzynarodowych projektach badawczych

6.A. Przed uzyskaniem stopnia doktora

Brak danych

6.B. Po uzyskaniu stopnia doktora

- 1999 – 2000: uczestnictwo w projekcie Rosyjskiej Fundacji Badań Podstawowych;
- 2003 - 2005: uczestnictwo w projekcie finansowanym przez Japońskie Ministerstwo Edukacji, Kultury, Sportu, Nauki i Technologii (MEXT) „Computational Materials Science Unit at Kyoto University”
- 2007 - 2010: uczestnictwo w projekcie finansowanym przez Estońską Fundację Nauki „Stimulation and control of optical processes in oxide nanomaterials: applications in photonics and sensorics”, zakończony 31.12.2010;
- 2007 - 2012: uczestnictwo w projekcie finansowanym przez Estońską Fundację Nauki „Low-dimensional structures and their applications”, zakończony 31.12.2012;
- 2008 – 2010: uczestnictwo w projekcie finansowanym przez Estońską Fundację Nauki „Functionalization of rare earth activated metal-oxides for application as phosphors and sensors”, zakończony 31.12.2010;
- 2010 – 2013: Kierownik projektu finansowanego przez Estońską Fundację Nauki „Ab initio and semi-empirical modeling of optical properties of materials doped with rare-earth and transition metal ions”, zakończenie 31.08.2013;
- 2011 – 2013: uczestnictwo w projekcie finansowanym przez Estońską Fundację Nauki „Temperature- and light-controlled defectiveness of metal oxides for application in optical gas sensing”, zakończenie 31.12.2013;
- 2011 – 2015: uczestnictwo w projekcie finansowanym przez Estońską Fundację Nauki „Design of advanced nanostructured materials with tailored properties for novel laser and light sources”, zakończenie 31.07.2015;

7. Lista wygłaszanych wystąpień konferencyjnych (po uzyskaniu stopnia doktora)

1. M.G. Brik, V.V. Zhorin, “Energy levels and non-radiative transitions probabilities calculations for Cr⁴⁺ in YAG”, Int. Conf. on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter. Conf. Handbook, Prague, 1996. P.O2-8.
2. T. Ishii, K. Ogasawara, M.G. Brik, I. Tanaka, H. Ikeno, “First principles calculations of optical spectra of rare earth ions in laser crystals”, Abstracts 2 Symposia: Category C &

- D, The 8th International Conference on Advanced Materials, IUMRS-ICAM 2003, October 8-13, 2003, Yokohama, Japan. P. 280.
3. M.G. Brik, I. Tanaka, T. Ishii, "Lattice vibrations and their influence on impurity ion energy levels in laser crystals", Abstracts 2 Symposia: Category C & D, The 8th International Conference on Advanced Materials, IUMRS-ICAM 2003, October 8-13, 2003, Yokohama, Japan. P. 288.
 4. T. Ishii, K. Ogasawara, S. Watanabe, I. Tanaka, H. Ikeno, M.G. Brik, "Calculations of rare-earth ions optical characteristics in a free state and crystals", Collected Abstracts of the 2003 Autumn Meeting of the Japan Institute of Metals, October 11-13, 2003. Sapporo, Japan. P. 264.
 5. K. Ogasawara, S. Watanabe, H. Toyoshima, T. Ishii, M.G. Brik, H. Ikeno, I. Tanaka, "Optical spectra of trivalent lanthanides in LiYF₄ crystal", 227th Meeting of American Chemical Society, Anaheim, March 28–April 1, 2004, Paper NUCL 84 (also in the Abstracts of papers of the American Chemical Society 227: U88-U88 84-NUCL Part 2, MAR 28 2004).
 6. T. Ishii, K. Ogasawara, M.G. Brik, "First principles calculations of spectral properties of luminescent materials doped with rare-earth ions", Extended abstracts of the 65th Autumn Meeting of the Japan Society of Applied Physics, Sendai, Japan, September 1-4, 2004, No. 3, p. 1264.
 7. K. Ogasawara, S. Watanabe, H. Toyoshima, M. G. Brik, I. Tanaka, T. Ishii, "Nonempirical relativistic configuration-interaction calculation of $4f^n$ and $4f^{n-1}5d^1$ multiplet structures of trivalent lanthanides in YVO₄ crystal", Abstracts of the XII Feofilov symposium on spectroscopy of crystals activated by rare earth and transition metal ions, Ekaterinburg-Zarechnyi, Russia, September 22-25, 2004, p. 5.
 8. G. Draganescu, M.G. Brik, C.N. Avram, N.M. Avram, "Non-radiative transitions in anharmonic model", Abstracts of the XII Feofilov symposium on spectroscopy of crystals activated by rare earth and transition metal ions, Ekaterinburg-Zarechnyi, Russia, September 22-25, 2004, p. 16.
 9. M.G. Brik, N.M. Avram, C.N. Avram, K. Ogasawara, T. Ishii, I. Tanaka, "Paramagnetic susceptibility and EPR g-factors simulations from crystal field effects for trivalent lanthanides in LiYF₄", Conference Program and Abstracts of the Asia Pacific EPR/ESR symposium, India, Bangalore, November 21-25, 2004, p.77-78.
 10. M.G. Brik, T. Ishii, K. Ogasawara, "Calculations of the Cr⁴⁺ and V³⁺ energy level schemes and absorption spectra in laser crystals", First Conference on Advances in

- Optical materials, Tucson, Arizona, USA, October 12-15, 2005. Delegate Manual, paper O19.
11. M.G. Brik, C.N. Avram, N.M. Avram, "Calculations of spin Hamiltonian parameters and analysis of trigonal distortions in $\text{LiSr}(\text{Al,Ga})\text{F}_6:\text{Cr}^{3+}$ crystals", Book of Abstracts of the VII Latin American Workshop on Magnetism, Magnetic Materials and Their Applications, Reñaca, Chile, December 12–16, 2005, p. 73.
 12. A. Majchrowski, K. Ozga, A. Suchocki, T. Lukasiewicz, I.V. Kityk, M.G. Brik, I. Sildos, A. Slezak, "Spectroscopic study of Pr-doped BiBO glass and $\text{Ca}_4\text{GdO}(\text{BO}_3)_3$ single crystals", Book of Abstracts of the First International Conference on Rare Earth Materials REMAT, Karpacz, Poland, September 21–26, 2008, p. O4.
 13. M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, "Ab-initio calculations of the optical properties of pure and Sm^{3+} -doped anatase and rutile TiO_2 ", Book of abstracts of the 2nd International Conference on Physics of Optical Materials and Devices ICOM 2009, Herceg Novi, Montenegro, August 26 – August 30 2009. P. 53.
 14. M.G. Brik, "Modeling of Optical Properties of 3d and 4f Ions", 216th ECS Meeting - Vienna, Austria. October 4 - October 9, 2009 (**Wykład zaproszony**)
 15. M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, J. Kikas, "Ab-initio modeling of optical and electronic properties of pure and rare-earth ions doped wide-gap crystals under varying hydrostatic pressure", Book of abstracts of International Conference "Functional materials and nanotechnologies FM&NT 2010", Riga, Latvia, March 16–19, 2010, P. 34.
 16. M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, "Ab initio and semi-empirical modeling of physical properties of pure and doped optoelectronic materials", Abstract Book of the 17th International Conference on Dynamical Processes in Excited States of Solids DPC'10, Argonne, USA, June 20–25, 2010, P. 99 (**Wykład zaproszony**).
 17. M.G. Brik, "Electronic and optical properties of CuXS_2 ($X = \text{Al, Ga, In}$) and AgGaS_2 semiconductors from first-principles calculations", Program and Abstract of the 4th International Conference on Optical, Optoelectronic and Photonic Materials and Applications, August 15–20, 2010, Budapest, Hungary, P. 112.
 18. M.G. Brik, I. Sildos, C.-G. Ma, V. Kiisk, "Ab initio Calculations of Electronic, Optical, Elastic Properties and Microscopic Treatment of Crystal Field Effects for Some Cubic Crystals", Book of Abstracts of the International Conference "Functional materials and nanotechnologies FM&NT 2011", April 5 – 8 2011, Riga, Latvia. P. 68.

19. M.G. Brik, "Ab initio calculations of structural, electronic, optical and elastic properties of CsXBr_3 ($X=\text{Ca, Ge, Sn}$)", 220th Electrochemical Society Meeting, October 9 – 14, 2011, Boston, USA, Abstract #1825.

8. Lista publikacji włączonych do rozprawy habilitacyjnej

OBLICZENIA PÓL-EMPIRYCZNE I Z PIERWSZYCH ZASAD WŁASNOŚCI OPTYCZNYCH JONÓW 3d i 4f w KRYSZTAŁACH

Tematyka publikacji:

A. Analiza struktury energetycznej metali przejściowych w kryształach przy pomocy teorii pola krystalicznego

1. E. Cavalli, A. Belletti, M.G. Brik, "Optical spectra and energy levels of the Cr^{3+} ions in MWO_4 ($M= \text{Mg, Zn, Cd}$) and MgMoO_4 crystals", Journal of Physics and Chemistry of Solids 69 (2008) 29–34.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu wszystkich obliczeń, opracowaniu wyników, i udziale w napisaniu manuskryptu. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 50%.

2. M.G. Brik, Y.Y. Yeung, "Semi-ab initio calculations of superposition model and crystal field parameters for Co^{2+} ions using the exchange charge model" Journal of Physics and Chemistry of Solids 69 (2008) 2401–2410.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu wszystkich obliczeń parametrów pola krystalicznego i poziomów energetycznych, analizie uzyskanych wyników, i udziale w napisaniu manuskryptu. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 60%.

3. M.G. Brik, N.M. Avram, "Microscopic analysis of the crystal field strength and electron-vibrational interaction in cubic SrTiO_3 doped with Cr^{3+} , Mn^{4+} and Fe^{5+} ions", Journal of Physics: Condensed Matter 21 (2009) 155502.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu wszystkich obliczeń parametrów pola krystalicznego, dyskusji uzyskanych wyników, napisaniu manuskryptu, i wysłaniu go do publikacji. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 75%.

4. M.G. Brik, A.M. Srivastava, N.M. Avram, “*Comparative analysis of crystal field effects and energy level scheme of six-fold coordinated Cr^{4+} in the pyrochlores, $Y_2B_2O_7$ ($B=Ti^{4+}, Sn^{4+}$)*”, Journal of Luminescence 131 (2011) 54–58.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu wszystkich obliczeń parametrów pola krystalicznego, porównaniu wyników z danymi eksperymentalnymi, i udziale w napisaniu manuskryptu. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 50%.

5. M.G. Brik, A.M. Srivastava, N.M. Avram, “*Comparative analysis of crystal field effects and optical spectroscopy of six-coordinated Mn^{4+} ion in the $Y_2Ti_2O_7$ and $Y_2Sn_2O_7$ pyrochlores*”, Optical Materials 33 (2011) 1671–1676.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu wszystkich obliczeń parametrów pola krystalicznego, dopasowaniu widm emisji, dyskusji uzyskanych wyników, i udziale w napisaniu manuskryptu. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 60%.

B. Obliczenia z pierwszych zasad własności optycznych jonów domieszek w kryształach

6. M.G. Brik, “*A complex first-principles study of the L2,3-edge XANES spectra and crystal field effects for divalent 3d-ions in cubic ZnS* ”, Journal of Physics and Chemistry of Solids 69 (2008) 2568–2577.
7. M.G. Brik, “*Complex study of the crystal field splitting, "ligand - impurity ion" charge transfer transitions and high lying 4f–6s intraconfigurational transitions for all trivalent lanthanides in Cs_2NaYCl_6 crystal*”, Journal of Alloys and Compounds 454 (2008) 38–45.

Jestem jedynym autorem tych dwóch publikacji, więc oceniam mój udział w ich przygotowaniu na 100%.

C. Przejścia nieradiacyjne i oddziaływanie elektronowo-wibronowe dla jonów 3d w kryształach.

8. M.G. Brik, N.M. Avram, C.N. Avram, “*Jahn-Teller Effect for 3d Ions (Orbital Triplets in a Cubic Crystal Field)*”, in: “*The Jahn-Teller Effects: Fundamentals and Implications for Physics and Chemistry*”, Editors H. Köppel, D.R. Yarkony, H. Barentzen, Springer, 2010, pp.347–370.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na dopasowaniu obliczeń efektu Jahna-Tellera, i udziale w napisaniu manuskryptu. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 50%.

D. Obliczenia *ab initio* własności strukturalnych, elektronowych, optycznych i elastycznych kryształów czystych i domieszkowanych.

9. M.G. Brik, “*First-principles study of the electronic and optical properties of CuXS₂ (X = Al, Ga, In) and AgGaS₂ ternary compounds*”, Journal of Physics: Condensed Matter 21 (2009) 485502.

Jestem jedynym autorem tej publikacji, więc oceniam mój udział w jej przygotowaniu na 100%.

10. A.M. Srivastava, M.G. Brik, “*Comparative ab initio study of electronic, optical and chemical bonding properties of pyrochlores, Y₂B₂O₇ (B=Ti⁴⁺, Sn⁴⁺)*”, Journal of Luminescence 130 (2010) 2368–2376.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu obliczeń *ab initio*, przygotowaniu wykresów i diagramów, i udziale w napisaniu manuskryptu. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 70%.

11. M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, “*First-principles calculations of optical and electronic properties of pure and Sm³⁺-doped TiO₂*”, Physica B 405 (2010) 2450–2456.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu obliczeń *ab initio*, przygotowaniu wykresów i diagramów, napisaniu manuskryptu i wysłaniu go do publikacji. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 75%.

12. M.G. Brik, A. Majchrowski, L. Jaroszewicz, A. Wojciechowski, I.V. Kityk, “*Spectroscopy of YAl₃(BO₃)₄:Cr³⁺ crystals following first principles and crystal field calculations*”, Philosophical Magazine 90 (2010) 4569–4578.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu obliczeń *ab initio*, przygotowaniu wykresów i diagramów, i udziale w napisaniu manuskryptu. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 50%.

13. M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, “*Calculations of physical properties of pure and doped crystals: Ab initio and semi-empirical methods in application to YAlO₃:Ce³⁺ and TiO₂*”, Journal of Luminescence 131 (2011) 396–403.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu obliczeń *ab initio*, przygotowaniu wykresów i diagramów, napisaniu manuskryptu i wysłaniu go do publikacji. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 75%.

14. M.G. Brik, “*Electronic, optical and elastic properties of $CuXS_2$ ($X=Al, Ga, In$) and $AgGaS_2$ semiconductors from first-principles calculations*”, *Physica Status Solidi C* 8 (2011) 2582–2584.

Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 100%.

15. M.G. Brik, C.-G. Ma, “*First-principles studies of the electronic and elastic properties of metal nitrides XN ($X = Sc, Ti, V, Cr, Zr, Nb$)*”, *Computational Materials Science* 51 (2012) 380–388.

Mój udział w przygotowaniu tej publikacji polegał na wykonaniu obliczeń ab initio, przygotowaniu wykresów i diagramów, napisaniu manuskryptu i wysłaniu go do publikacji. Oceniam mój udział w przygotowaniu tej publikacji na 75%.

Załączono oświadczenia współautorów wymienionych powyżej publikacji, o ich wkładzie w ich przygotowanie.

9. Podsumowanie prac badawczych

9.1 Podsumowanie wyników badań otrzymanych przed uzyskaniem stopnia doktora nauk fizycznych

Od trzeciego roku studiów na Uniwersytecie Państwowym w Kubaniu (KubSU) w Krasnodarze brałem udział w studenckich pracach naukowych. W ich efekcie, uczestniczyłem w ogólnozwiązkowych (ZSRR) studenckich konferencjach fizyki (w Nowosybirsku, w 1991 roku) i fizyki optycznej (w Tomsku, w 1991). Na tej drugiej nagrodzono mnie dyplomem pierwszego stopnia za jedną z najlepszych prezentacji. Od września 1992 do listopada 1995 uczestniczyłem w studiach doktoranckich na Wydziale Fizyki Doświadczalnej KubSU. Moja rozprawa doktorska była poświęcona teoretycznym obliczeniom struktury energetycznej jonów domieszkowych w kryształach laserowych i rozwojowi modelu przejść niepromienistych pomiędzy ich poziomami energetycznymi. Promotorem mojego doktoratu był (nieżyjący już) Prof. Dr. V.F. Pisarenko; również ściśle współpracowałem z dr. A.G. Avanesovem (również już nieżyjącym) i Dr. V.V. Zhorin (niegdyś z KubSu, później pracujący w Argonne National Laboratory w USA, obecnie zaś na Wydziale Ekonomii Uniwersytetu w Chicago, USA). Główne wyniki mojej pracy doktorskiej zostały zaprezentowane na kilku konferencjach (konferencje z moim osobistym udziałem są zaznaczone tłustym drukiem):

- X Feofilov Symposium on Spectroscopy of Crystals Activated by Rare-Earth and Transitional Ions, Saint-Petersburg, Russia, June 1995.
- **IX International Conference ICPS'94, Saint-Petersburg, Russia, August 1994.**
- III International School "Excited States of Elements", Wrocław, Poland, 1994.
- **International Conference on Luminescence, Moscow, Russia, November 1994.**

Główne wyniki mojej rozprawy doktorskiej są następujące:

- wykazanie wyraźnej zależności struktury energetycznej jonów domieszek od chwilowej konfiguracji ligandów. W wyniku dokładnej analizy pozycji ligandów, pokazano zależność poziomów energetycznych domieszek od natężeń wibronowych modów normalnych dla kompleksów tetraedrycznych i oktaedrycznych.
- rozwój nowego modelu przecinania się poziomów energetycznych w teorii przejść nie-promienistych (NRT). Zgodnie z tym modelem NRT zachodzą, kiedy czyste poziomy elektronowe jonów domieszek krzyżują się poziomami wibronowymi ligandów. Uzyskano analityczną zależność prawdopodobieństwa NRT od temperatury w przybliżeniu harmonicznym i z powodzeniem zastosowano dla przypadku domieszki jonu Cr^{4+} w kryształach $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (dla przejść ${}^3\text{T}_2 - {}^3\text{A}_2$ w jonach Cr^{4+}) (M.G. Brik, "Non-radiative transitions in the model of energy levels crossing", Proc. of the IX Int. Conf. ICPS'94, Saint-Petersburg, Russia, 1994, p.13–19).
- ustalenie bliskiego związku między modelem wymiany ładunku w teorii pola krystalicznego a procesami NRT, w tym opracowaną uprzednio liniową teorię oddziaływania elektronowo-wibronowego. Dla dobrze znanego przypadku układu $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ była badana i porównana z dostępnymi danymi doświadczalnymi temperaturowa zależność prawdopodobieństwa przejść nieradiacyjnych pomiędzy poziomami ${}^4\text{T}_2 - {}^4\text{A}_2$.

Podczas wykonywania mojej pracy doktorskiej współkierowałem studenckimi projektami badawczymi i prowadziłem wykłady na temat wybranych elementów teorii luminescencji i teorii grup dla piątego roku studiów fizyki.

Pracę doktorską obroniłem 23 listopada 1995, a stopień naukowy Kandydata Nauk Fizycznych i Matematycznych został zatwierdzony przez Wszech-Rosyjski Komitet do Spraw Stopni i Tytułów Naukowych 9 lutego 1996.

9.2 Podsumowanie wyników naukowych otrzymanych po uzyskaniu stopnia doktora

Od maja 1996 do września 1997 roku byłem zatrudniony jako Młodszy Asystent na Wydziale Fizyki Doświadczalnej KubSU. Kontynuowałem badania oddziaływania elektronowo-wibronowego i NRT w kryształach domieszkowanych jonami 3d. Główne wyniki z tamtego roku pracy zostały zaprezentowane na Międzynarodowej Konferencji Luminescencji w Pradze (1996) i opublikowane w pracy M.G. Brik, V.V. Zhorin, *J. Lumin.* 72-74 (1997) 149-151.

Od września 1997 do marca 1998 pracowałem jako Starszy Wykładowca na Wydziale Fizyki Ogólnej KubSU. Awansowałem na stanowisko profesora nadzwyczajnego w marcu 1998, a 20 lutego 2001 otrzymałem certyfikat Docenta, wydany przez rosyjskie Ministerstwo Edukacji. Od września 1997 do września 2000 moje obowiązki polegały na prowadzeniu wielu zajęć dydaktycznych. Całkowita liczba godzin dydaktycznych wynosiła 780 rocznie (było to normalne obciążenie obowiązkami dydaktycznymi na pełnym etacie w Rosji w tym czasie). Przygotowałem i prowadziłem kilka cykli wykładów, i.in. Mechanika (w ramach Fizyki Ogólnej); Mechanika Stosowana; Wprowadzenie do Teorii Kwantowej Atomów i Cząsteczek; Teoria Widm Atomowych; prowadziłem też ćwiczenia do wszystkich tych kursów i laboratoriów z mechaniki i optyki. Opiekowałem się również studenckimi badaniami naukowymi i byłem promotorem projektów dyplomowych.

Moja praca naukowa w tym czasie była połączeniem mojej poprzedniej działalności związanej z badaniami jonów 3d (M.G. Brik, D.G. Shekoldin, *Optics and Spectroscopy* 84 (1998) 683-684; A.G. Avanesov, M.G. Brik, E.N. Tumayev, *J. Lumin.* 92 (2001) 133-137) i rozpoczęciem nowego dla mnie tematu – badań jonów ziem rzadkich w kryształach laserowych (V.A. Lebedev, V.F. Pisarenko, N.V. Selina, A.A. Perfilin, M.G. Brik, *Opt. Mater.* 14 (2000) 121-126). Nie wymieniam tu kilku prac opublikowanych w lokalnych rosyjskich czasopismach.

Oprócz prowadzenia zajęć dydaktycznych oraz prac badawczych, w ciągu tych trzech lat również przygotowałem dwa podręczniki (skrypty) dla studentów: i) M.G. Brik, I.D. Bregeda, M.P. Matveyakin, „Metody opracowywania wyników doświadczalnych w laboratorium fizycznym” (w języku rosyjskim), Krasnodar, Państwowy Uniwersytet w Kubaniu, 1997, 73 strony, i ii) M.G. Brik, I.D. Bregeda, M.P. Matveyakin, „Mechanika: zadania z rozwiązaniami” (w języku rosyjskim), Krasnodar, Państwowy Uniwersytet w Kubaniu, 2000, 112 stron.

We wrześniu 2000 roku Prof. M.M. Avram (Uniwersytet Zachodni w Timisoarze, Rumunia) zaprosił mnie do odwiedzenia jego grupy badawczej i wygłoszenia tam cyklu czterech seminariów o teorii pola krystalicznego i oddziaływaniu elektronowo-wibronowym

w jonach domieszek. Ta wizyta okazała się być początkiem bardzo długiej i owocnej współpracy naukowej.

W październiku 2000 roku przenieśliem się do Asmary, Erytrea, gdzie objąłem stanowisko profesora nadzwyczajnego w Instytucie Fizyki Uniwersytetu w Asmarze. Przebywałem tam do końca grudnia 2001. Moje główne obowiązki polegały na dydaktyce: wykładałem tam fizykę statystyczną, elektrodynamikę, i mechanikę kwantową. Uczestniczyłem w konferencji CLEO-Europa w Monachium, Niemcy (czerwiec 2001) i XI Symposium Feofilova w Kazaniu, Rosja (październik 2001), gdzie miałem kilka prezentacji plakatowych. W roku 2001 wydałem dwa podręczniki (skrypty) dla studentów Uniwersytetu Asmarskiego: i) M.G. Brik, S.S. Kotelnikov, M.Kahsay, "Physics 206: Electricity and Optics. Laboratory Manual", University of Asmara, Asmara, 2001, 56 stron, i ii) M.G. Brik, S.S. Kotelnikov, "Kinematics: problems with solutions", University of Asmara, Asmara, 2001, 26 stron.

Od końca grudnia 2001 roku do końca grudnia 2002 pracowałem jako naukowiec wizytujący (Visiting Scientist) na Wydziale Chemii Fizycznej Instytutu Nauki Weizmanna w Rehovot w Izraelu. Moje badania skupiały się głównie na analizie teoretycznej widm absorpcji i emisji cząsteczek wieloatomowych: modelowaniu kształtu pasm emisji z uwzględnieniem wszystkich modów drgań normalnych i zmniejszenia częstości modów normalnych w stanie wzbudzonym (Reuven Ianconesu, Mikhail G. Brik, Eli Pollak, New Journal of Physics 7 (2005) 22). Kontynuacja prac badawczych jonów 3d w kryształach laserowych (Cr^{3+} w Al_2O_3 i LiCaAlF_6) dała w wyniku kilka prezentacji na Międzynarodowej Konferencji Luminescencji (ICL'2002) w Budapeszcie w 2002 roku i "Advanced Solid State Lasers" w Montrealu (prezentowane przez mojego współpracownika).

Od marca 2003 do lipca 2007 pracowałem w Japonii, w Fukui Institute na Wydziale Fundamental Chemistry, Kyoto University, i (między lipcem 2005 i październikiem 2006) jednocześnie na Uniwersytecie Kwansei Gakuin, w Sanda, Japonia. Podczas mojego pobytu w Japonii brałem udział w obliczeniach *ab initio* struktury energetycznej i widm absorpcyjnych jonów ziem rzadkich i metali przejściowych w kryształach. Dodatkowo, widma XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) dla jonów 3d były modelowane przy pomocy metod *ab initio*. Metoda DV-ME (discrete variational multi-electron) była używana jako główne narzędzie dla obliczeń *ab initio*. Metoda ta opiera się na numerycznym rozwiązaniu równania Diraca; program dla tych obliczeń został opracowany przez Prof. Prof. S. Adachi i K. Ogasawara. Główne wyniki uzyskane podczas tych 4 lat były następujące:

- rozszerzenie standardowego diagramu Dieke na zakres UV i VUV poprzez obliczenie *pełnego* zestawu poziomów energetycznych dla konfiguracji $4f^N$ i $4f^{N-1}5d$ wszystkich trójwartościowych lantanowców;

- systematyczna analiza, symulacja i identyfikacja widm $4f-5d$ dla szeregu z trójwartościowych lantanowców (Ce^{3+} , Pr^{3+} , Nd^{3+} , Ho^{3+} , Er^{3+} , Tm^{3+}) w $LiYF_4$;

- rozszerzenie modelu przecinania się poziomów energetycznych w teorii NRT w przybliżeniu anharmonicznym (oscylator Morse'a);

- rozwój cyklu programów komputerowych dla obliczania parametrów pola krystalicznego i diagonalizacji Hamiltonianu pola krystalicznego dla wszystkich konfiguracji elektronowych $3d^N$ w zastosowaniu do analizy widm absorpcyjnych kryształów laserowych domieszkowanych jonami metali przejściowych;

- rozwój cyklu programów komputerowych do obliczeń podwójnie zredukowanych elementów macierzowych operatorów tensorowych wymaganych dla zastosowania teorii Judd'a-Ofelt'a (zarówno standardowej jak i zmodyfikowanej) dla wszystkich lantanowców trójwartościowych.

Podsumowanie moich obliczeń z pierwszych zasad zostało zaprezentowane w książce "First-principles Calculations of Spectral Properties of Rare-Earth and Transition Metal Ions in Crystals", Editors Mikhail G. Brik i Kazuyoshi Ogasawara, Transworld Research Network, 2006, i w rozdziale książki K. Ogasawara, S. Watanabe, H. Toyoshima, M.G. Brik "First principles calculations of $4f^n - 4f^{n-1}5d$ transition spectra", Handbook on the Physics and Chemistry of the Rare Earths, Vol. 37, North Holland, Amsterdam. Edited by K.A. Gschneidner, Jr., J.-C.G. Bünzli and V.K. Pecharsky, 2007, str. 1-59.

W 2006 roku otrzymałem nagrodę im. Dragomira Hurmuzescu Akademii Rumuńskiej (razem z N.M. Avramem, C.N. Avram, i I. Tanaka).

Od lipca 2007 pracuję w Instytucie Fizyki, Uniwersytetu w Tartu, najpierw jako Profesor Wizytujący (Visiting Professor) (do lipca 2008), następnie jako Nadzwyczajny Starszy Pracownik Naukowy i, w końcu, od lutego 2010, jako Profesor Teorii Materiałów. Moje obecne zainteresowania badawcze skupiają się na następujących tematach: i) obliczenia *ab initio* elektronowych, optycznych i elastycznych własności kryształów czystych i domieszkowanych; ii) analiza pola krystalicznego i struktury energetycznej domieszek w kryształach; iii) jednoczesne zastosowanie metody *ab initio* i teorii pola krystalicznego do tych samych materiałów w celu otrzymania uzupełniających informacji o ich własnościach; iv) badania mikroskopowych efektów pola krystalicznego – zależności siły pola krystalicznego od odległości międzyjonowych i jego odzwierciedlenie w widmach

optycznych; v) badania oddziaływania elektronowo-wibronowego dla jonów metali przejściowych i ziem rzadkich.

Oprócz powyżej wspomnianej działalności badawczej, prowadzę cykl wykładów "Spektroskopia atomów, cząsteczek i kryształów" dla magistrantów i doktorantów Uniwersytetu Tartu, który został wydany w postaci podręcznika: M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk "Introduction to spectroscopy of atoms, molecules and crystals" Tartu University Press, 2008, 234 strony. Byłem również ko-promotorem jednej rozprawy doktorskiej (już obronionej): Sven Lange, 2010, Promotorzy Ilmo Sildos, Mikhail G. Brik, Spectroscopic and Phase-stabilization Properties of Pure and Rare-earth Ions Activated ZrO₂ and HfO₂, Uniwersytet w Tartu, Wydział Nauki i Technologii, Instytut Fizyki, Uniwersytet w Tartu.

Obecnie kieruję dwoma post-doktorskimi pracownikami naukowymi: Dr. Chong-Geng Ma i Dr. V. Krasnenko. Jestem kierownikiem projektu badawczego finansowanego przez Estońską Fundację Naukową (wrzesień 2010 - wrzesień 2013; całkowity budżet 100,341. 29 EUR, (1,500, 000 dawnych koron estońskich), a Dr. Ma jest głównym wykonawcą w tym projekcie.

Obecnie jestem zaangażowany w trzy projekty badawcze: i) Projektowanie zaawansowanych nanostrukturyzowanych materiałów dla zastosowań w nowych laserach i źródłach światła; ii) Defekty indukowane temperaturą i światłem w tlenkach metali dla zastosowań w optycznej detekcji gazów; iii) Struktury niskowymiarowe i ich zastosowania. Informacje o tych projektach można znaleźć pod adresem:

<https://www.etis.ee/portaal/isikuCV.aspx?TextBoxName=brik&PersonVID=55817&FromUrl0=isikud.aspx>

W roku 2008 zostałem mianowany Honorowym Profesorem Nadzwyczajnym, a we wrześniu 2011 Honorowym Profesorem na Wydziale Nauki i Badań Środowiska Instytutu Edukacji w Hong Kongu.

9.2.1 Osiągnięcia naukowe wchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej

Obliczenia pół-empiryczne i z pierwszych zasad własności optycznych jonów 3d i 4f w kryształach

Jony z niezapełnionymi powłokami elektronowymi d i f w kryształach (albo jako domieszki intencjonalne lub będące częścią sieci krystalicznej w wyniku tak zwanego auto-

domieszkowania krysztalów) są szeroko badane przez kilka ostatnich dekad. Jest to spowodowane posiadaniem przez te materiały wyjątkowych własności (optycznych, magnetycznych, elektrycznych, nieliniowych optycznych, etc), które czynią je przydatnymi do licznych zastosowań takich jak półprzewodnikowe aktywne materiały laserowe, materiały luminescencyjne, detektory optyczne, czy nieliniowe urządzenia optyczne itd. Duża liczba poziomów energetycznych w szerokim zakresie widmowym, w szczególności dla jonów pochodzących ze środka serii metali przejściowych (TM) i ziem rzadkich (RE), w połączeniu z różnymi materiałami domieszkowanymi, będącymi źródłem pól krystalicznych o różnych symetriach i sile, powodują, że absorpcyjne widma optyczne tych jonów mogą zawierać bardzo dużą liczbę pasm absorpcyjnych w różnych zakresach widmowych, od podczerwieni (IR) poprzez ultrafiolet (UV) do ultrafioletu próżniowego (VUV).

Niniejsza praca habilitacyjna jest poświęcona dalszemu rozwojowi i systematycznemu zastosowaniu kilku metod obliczeniowych pół-empirycznych i z pierwszych zasad do obliczeń poziomów energetycznych, widm absorpcyjnych (w zakresie optycznym i w zakresie promieniowania rentgenowskiego), prawdopodobieństw przejść niepromienistych, wyznaczania efektów mikroskopowych pola krystalicznego i oddziaływania elektronowo-wibronowego w różnych krysztalach zawierających jony TM i RE. Wykonane systematyczne obliczenia pozwoliły ujawnić wspólne tendencje dla różnych typów materiałów i domieszek, które są dyskutowane w tej pracy. Praca habilitacyjna składa się z 15 publikacji wymienionych poniżej, zgrupowanych w 4 kategorie A, B, C, i D.

Nowe wyniki uzyskane w tej rozprawie można pogrupować w sposób następujący:

1. Model wymiany ładunku (exchange charge model) (ECM) w modelu pola krystalicznego (CF) [1] (rozwinęty i początkowo zastosowany głównie do jonów RE) został systematycznie zastosowany do analizy widm optycznych dużej liczby krysztalów domieszkowanych jonami z powłoką $3d$ [2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16]. Wraz z wyznaczeniem parametrów pola krystalicznego (CFP) i obliczeniami poziomów energetycznych, aspekty symetrii centrów domieszkowych i warunki zbieżności sum sieciowych zostały dokładnie zbadane [9,11,14]. Szereg oryginalnych programów MAPLE zostało napisanych do obliczeń wartości CFP i diagonalizacji hamiltonianu pola krystalicznego (z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita i poprawki Trees'a) dla jonów z dowolną liczbą elektronów d w polu krystalicznym o dowolnej symetrii (**prace A1, A3-A5**).

2. Po raz pierwszy dwa niezależne modele pola krystalicznego - model ECM i model superpozycji (SM) - zostały połączone ze sobą [12]. Używając zależności od odległości

niezmienników pola krystalicznego, parametry modelu SM (wykładniki potęgowe i parametry wewnętrzne) zostały policzone w wiarygodny sposób, a nie jako zmieniane w dowolny sposób, jak to robiono poprzednio (**praca A2**).

3. Po raz pierwszy tzw. wieloelektronowa dyskretna metoda wariacyjna (discrete variational multielectron method - DVME) [17] została zastosowana w następujących przypadkach:

a) obliczenia komputerowe poziomów energetycznych i widm absorpcyjnych (w zakresie optycznym oraz promieniowania rentgenowskiego) dla jonów $3d$ i $4f$ dla szeregu kryształów [18,19,20]. Rozważano efekty kowalencyjne, skład orbitali molekularnych (MO), ich względne położenie w różnych kompleksach; badano zależność powyższych efektów od stanu ładunkowego jonu centralnego, jego liczby atomowej, i rodzaju ligandów (**praca B6**);

b) przeprowadzono analizę mikroskopową wpływu efektów pola krystalicznego i przejść z przeniesieniem ładunku (charge transfer – CT) pomiędzy jonami domieszki i ligandami dla jonów metali przejściowych i ziem rzadkich w elpasolitach kubicznych [21,22] (**praca B7**).

4. Wykonano dogłębną analizę dynamicznego efektu Jahna-Tellera na stanie ${}^4T_{2g}$ jonów $3d^3$ (V^{2+} , Cr^{3+} , Mn^{4+}) z uwzględnieniem efektu Ham'a (wygaszania rozszczepienia spin-orbita) i geometrii konfiguracji ligandów w stanie wbudowanym. W ten sposób obliczono wielkość przesunięć ligandów w wyniku łącznego wpływu modów a_{1g} i e_g w kompleksach oktaedrycznych oraz wyznaczono przekroje powierzchni energii potencjalnej dla szeregu kompleksów oktaedrycznych [23,24,25] (**praca C8**).

5. Wykonano dokładne badania przy pomocy teorii funkcjonału gęstości (DFT) (takie jak użyte w opartym na falach płaskich programie CASTEP) własności strukturalnych, elektronowych, optycznych, i elastycznych, szeregu związków czystych i domieszkowanych [26,27,28,29,30,31,32,33,34,35,36,37]. Dla czystych kryształów modelowano efekty ciśnieniowe w celu zanalizowania, jak odległości międzyjonowe, przerwa energetyczna, i rozkłady gęstości elektronowej zmieniają się pod wpływem przyłożonego ciśnienia hydrostatycznego. Dla kryształów domieszkowanych szczególną uwagę zwracano na modyfikację własności elektronowych i optycznych związanych z domieszkowaniem. W szczególności badano położenie energetyczne najniższego poziomu domieszkowego w przerwie energetycznej kryształu dla szeregu systemów mających praktyczne jak i potencjalne zastosowania. Po raz pierwszy metodę *ab initio* oraz teorię pola krystalicznego zastosowano równocześnie do tych samych układów (takich jak $YAlO_3:Ce^{3+}$,

$\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4:\text{Cr}^{3+}$, $\text{CdI}_2:\text{Ni}^{2+}$) dla otrzymania komplementarnego obrazu własności elektronowych i optycznych tych związków. Taka kombinacja dwóch różnych podejść badawczych jest bardzo silnym narzędziem dla głębszych badań kryształów domieszkowanych. Rozwinięto oryginalną technikę badania mikroskopowych efektów pola krystalicznego poprzez badanie rozkładu pików gęstości stanów elektronowych 3d, która była następnie praktycznie testowana. Szczególną uwagę poświęcono modelowaniu przy pomocy metody *ab initio* efektów ciśnieniowych i ich wpływu na własności strukturalne, elektronowe, optyczne, i elastyczne różnych kryształów. Badano także anizotropię elastyczną kryształów kubicznych (zależność modułów Young'a od kierunku krystalograficznego w kryształach) **(prace D9-D15)**.

9.3. Podsumowanie

W wyniku mojej pracy w tematyce pracy habilitacyjnej od 2003 roku do teraz ukazało się ponad 160 publikacji w międzynarodowych czasopismach naukowych (wymienionych w bazach danych ISI/Scopus); w 77 pracach jestem pierwszym lub jedynym autorem. Przedstawiono ponad 100 prezentacji konferencyjnych na konferencjach międzynarodowych (wliczając w to wykłady zaproszone na 216th Electrochemical Society Meeting (Vienna, Austria, 2008), 17th International Conference on Dynamical Processes in Excited States of Solids DPC'10 (Argonne, USA, 2010).

Odbyłem szereg krótkich wizyt badawczych w laboratoriach moich współpracowników i we współpracujących grupach badawczych (podczas prawie każdej wizyty wygłaszałem seminaria dla członków odwiedzanych grup badawczych), m.in w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk (Warszawa, Polska); Politechnice Czestochowskiej (Częstochowa, Polska); University of Texas w San Antonio, Argonne National Laboratory, GE Global Research (wszystkie w USA); Universidad de Guanajuato and Centro de Investigaciones de Optica (Meksyk); Institute for Laser Physics (Hamburg, Niemcy); Uniwersytety w Weronie i w Padwie (Włochy); Uniwersytet Zachodni w Timisoarze (Timisoara, Rumunia); The Hong Kong Institute of Education (Hong Kong, Chiny); The Australian National University (Canberra, Australia); University of Canterbury (Christchurch, Nowa Zelandia); Assiut University (Assiut, Egipt).

Podziękowania

Niniejsza rozprawa habilitacyjna jest podsumowaniem ostatnich 8 lat mojej pracy, która była prowadzona w Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Japonia (2003 – 2007) i w Instytucie Fizyki, Uniwersytet w Tartu, Estonia (od 2007 do dzisiaj). Te lata były wypełnione interesującą pracą i ekscytującymi spotkaniami i kontaktami z wieloma kolegami (wielu z nich stało się moimi przyjaciółmi), którym jestem bardzo wdzięczny:

Prof. Nicolae M. Avramowi, Calin N. Avram, Georghe E. Draganescu: za ich zachęcające poparcie i absolutną przyjaźń. Moja międzynarodowa kariera rozpoczęła się wraz z moją pierwszą wizytą na Uniwersytecie Zachodnim w Timisoarze w 2000 roku. Zawsze przypominam sobie z najwyższą przyjemnością nasze spacerowanie w Timisoarze i w Buziash, a także spotkania z Prof. N.M. Avramem w wielu innych krajach;

Prof. Isao Tanaka – za wprowadzenie mnie w tematykę obliczeń *ab initio*, dając mi niespotykaną swobodę w wyborze tematów badań podczas mojego pobytu w Kioto i poparcie we wszystkich moich działaniach;

Prof. Peter A. Tannerowi – za zwrócenie mojej uwagi na elpasolity kubiczne, za jego przyjaźń, i nieprawdopodobnie wielkie poczucie humoru;

Dr. I. Sildosowi, Dr. M. Kirmowi i wielu innym kolegom z Instytutu Fizyki Uniwersytetu w Tartu – za ich przyjaźń, ciągłe poparcie i wspólne projekty badawcze;

Prof. Andrzejowi Suchockiemu and Dr. Agacie Kamińskiej – za ich przyjaźń, poparcie i włączenie mnie w ekscytujące projekty badań wpływu wysokich ciśnień na widma optyczne ziem rzadkich w różnych kryształach;

Prof. Iwanowi V. Kitykowi – za jego przyjaźń i niezwykle aktywność naukową;

Dr. Alok M. Srivastava – za jego przyjaźń i umiejętność znajdowania ciekawych i niezwykle ciekawych wyników eksperymentalnych, które oczekują na wyjaśnienie teoretyczne;

Prof. Marco Bettinelli and Enrico Cavalli – za ich przyjaźń i interesujące wspólne projekty badawcze;

Prof. Michael F. Read'owi – za stymulujące dyskusje o spektroskopii ziem rzadkich i jego gościnność podczas mojej wizyty w Nowej Zelandii.

Z wszystkimi tutaj wymienionymi (oraz z wszystkimi innymi, dla wymienienia których po prostu nie wystarczyłoby mi tutaj miejsca), odbyłem bardzo interesujące rozmowy i dyskusje, zarówno profesjonalne jak i prywatne, podczas spotkań w różnych miejscach w świecie.

W końcu chciałbym podziękować mojej Rodzinie na cierpliwość i wyrozumiałość. Wreszcie, jestem ogromnie zobowiązany mojej Mamie i mojemu nieżyjącemu już Ojcu, którym dedykuję tę rozprawę.

Tartu, Estonia, 17.III.2012 r



data

Podpis

9.4 Odnošniki

- ¹ B.Z. Malkin, in: A.A. Kaplyanskii, B.M. Macfarlane (Eds.), *Spectroscopy of solids containing rare-earth ions*, North-Holland, Amsterdam, 1987, pp. 33–50.
- ² M.G. Brik, N.M. Avram, C.N. Avram, “Crystal field analysis of energy level structure of the Cr_2O_3 antiferromagnet”, *Solid State Communications* 132 (2004) 831–835.
- ³ M.G. Brik, N.M. Avram, C.N. Avram, “Crystal field analysis of the ground and excited state absorption of a Cr^{3+} ion in LiAlO_2 and LiGaO_2 crystals”, *Central European Journal of Physics*, 3(4) (2005) 508–524.
- ⁴ M.G. Brik, N.M. Avram, C.N. Avram, “Crystal field analysis of energy level structure of $\text{LiAlO}_2:\text{V}^{3+}$ and $\text{LiGaO}_2:\text{V}^{3+}$ ”, *Spectrochimica Acta A* 63 (2006) 759–765.
- ⁵ M.G. Brik, N.M. Avram, C.N. Avram, “Comparative crystal field study of Ni^{2+} energy levels in NiCl_2 , NiBr_2 , and NiI_2 crystals”, *Physica B* 371 (2006) 43–49.
- ⁶ M.G. Brik, “Crystal field analysis of the absorption spectra and electron-phonon interaction in $\text{Ca}_3\text{Sc}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}:\text{Ni}^{2+}$ ”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 67 (2006) 738–744.
- ⁷ M.G. Brik, N.M. Avram, “Nephelauxetic effect for the isoelectronic $3d^3$ -ions (Cr^{3+} , Mn^{4+} , Fe^{5+}) in SrTiO_3 ”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 67 (2006) 1599–1604.
- ⁸ M.G. Brik, I.V. Kityk, “Spectroscopic and crystal field studies of $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4:\text{Co}^{2+}$ ”, *Solid State Communications* 143 (2007) 326–330.
- ⁹ E. Cavalli, A. Belletti, M.G. Brik, “Optical spectra and energy levels of the Cr^{3+} ions in MWO_4 ($M = \text{Mg}$, Zn , Cd) and MgMoO_4 crystals”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 69 (2008) 29–34.
- ¹⁰ M.G. Brik, C.N. Avram, N.M. Avram, “Comparative study of crystal field effects for Ni^{2+} ion in LiGa_5O_8 , MgF_2 and AgCl crystals”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 69 (2008) 1796–1801.
- ¹¹ M.G. Brik, A. El-Korashy, M. Almokhtar, “Exchange charge model calculations of crystal field parameters and crystal field energy levels for $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{CoCl}_4$ and $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{MnCl}_4$ single crystals”, *Journal of Alloys and Compounds* 459 (2008) 71–77.
- ¹² M.G. Brik, Y.Y. Yeung, “Semi-ab initio calculations of superposition model and crystal field parameters for Co^{2+} ions using the exchange charge model” *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 69 (2008) 2401–2410.
- ¹³ M.G. Brik, N.M. Avram, “Microscopic analysis of the crystal field strength and electron-vibrational interaction in cubic SrTiO_3 doped with Cr^{3+} , Mn^{4+} and Fe^{5+} ions”, *Journal of Physics: Condensed Matter* 21 (2009) 155502.
- ¹⁴ M.G. Brik, E. Cavalli, R. Borromei, M. Bettinelli, “Crystal field parameters and energy level structure of the MnO_4^{3-} tetraoxo anion in Li_3PO_4 , $\text{Ca}_2\text{PO}_4\text{Cl}$ and $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ crystals”, *Journal of Luminescence* 129 (2009) 801–806.
- ¹⁵ M.G. Brik, A.M. Srivastava, N.M. Avram, “Comparative analysis of crystal field effects and energy level scheme of six-fold coordinated Cr^{3+} in the pyrochlores, $\text{Y}_2\text{B}_2\text{O}_7$ ($B = \text{Ti}^{3+}$, Sn^{4+})”, *Journal of Luminescence* 131 (2011) 54–58.
- ¹⁶ M.G. Brik, A.M. Srivastava, N.M. Avram, “Comparative analysis of crystal field effects and optical spectroscopy of six-coordinated Mn^{4+} ion in the $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ and $\text{Y}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$ pyrochlores”, *Optical Materials* 33 (2011) 1671–1676.
- ¹⁷ K. Ogasawara, T. Iwata, Y. Koyama, T. Ishii, I. Tanaka, and H. Adachi, “Relativistic cluster calculation of ligand-field multiplet effects on cation $L_{2,3}$ x-ray-absorption edges of SrTiO_3 , NiO , and CaF_2 ”, *Phys. Rev. B* 64 (2001) 115413.
- ¹⁸ M.G. Brik, “First-principles analysis of the $\text{MgAl}_2\text{O}_4:\text{Ni}^{2+}$ absorption spectrum”, *Journal of Luminescence* 124 (2007) 23–27.

- ¹⁹ M.G. Brik, "Comparative first-principles analysis of the absorption spectra of $ZnAl_2S_4$ and $ZnGa_2O_4$ crystals doped with Cr^{3+} ", European Physical Journal B 49 (2006) 269–274.
- ²⁰ M.G. Brik, "A complex first-principles study of the L2,3-edge XANES spectra and crystal field effects for divalent 3d-ions in cubic ZnS ", Journal of Physics and Chemistry of Solids 69 (2008) 2568–2577.
- ²¹ M.G. Brik, "Influence of chemical bond length changes on the crystal field strength and "ligand – metal" charge transfer transitions in Cs_2GeF_6 doped with Mn^{2+} and Os^{3+} ions", Journal of Physics and Chemistry of Solids 68 (2007) 1341–1347.
- ²² M.G. Brik, "Complex study of the crystal field splitting, "ligand - impurity ion" charge transfer transitions and high lying 4f – 6s intraconfigurational transitions for all trivalent lanthanides in Cs_2NaYCl_6 crystal", Journal of Alloys and Compounds 454 (2008) 38–45.
- ²³ C.N. Avram, M.G. Brik, "Manifestation of vibronic interaction in the fine structure of Cr^{3+} energy levels in laser crystal $LiCaAlF_6:Cr^{3+}$ ", Journal of Luminescence, 102-103 (2003) 81–84.
- ²⁴ M.G. Brik, N.M. Avram, "Comparative study of the Jahn–Teller effect in the ${}^4T_{2g}$ excited electron state of Cr^{3+} ion in elpasolite crystals", Journal of Molecular Structure 838 (2007) 198–202.
- ²⁵ M.G. Brik, N.M. Avram, C.N. Avram, "Jahn-Teller Effect for 3d Ions (Orbital Triplets in a Cubic Crystal Field)", in: "The Jahn-Teller Effects: Fundamentals and Implications for Physics and Chemistry", Editors H. Köppel, D.R. Yarkony, H. Barentzen, Springer, 2010, pp.347–370.
- ²⁶ M.G. Brik, "First-principles study of the electronic and optical properties of $CuXS_2$ ($X = Al, Ga, In$) and $AgGaS_2$ ternary compounds", Journal of Physics: Condensed Matter 21 (2009) 485502.
- ²⁷ M.G. Brik, " Cs_2XF_6 ($X=Si, Ge$) compounds: Common and different features as uncovered by the first-principles calculations", Solid State Communications 150 (2010) 1529–1533.
- ²⁸ M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, "First-principles calculations of optical and electronic properties of pure and Sm^{3+} -doped TiO_2 ", Physica B 405 (2010) 2450–2456.
- ²⁹ M.G. Brik, "First-principles calculations of electronic, optical and elastic properties of $ZnAl_2S_4$ and $ZnGa_2O_4$ ", Journal of Physics and Chemistry of Solids 71 (2010) 1435–1442.
- ³⁰ A.M. Srivastava, M.G. Brik, "Comparative ab initio study of electronic, optical and chemical bonding properties of pyrochlores, $Y_2B_2O_7$ ($B=Ti^{4+}, Sn^{4+}$)", Journal of Luminescence 130 (2010) 2368–2376.
- ³¹ M.G. Brik, A. Majchrowski, L. Jaroszewicz, A. Wojciechowski, I.V. Kityk, "Spectroscopy of $YAl_3(BO_3)_4:Cr^{3+}$ crystals following first principles and crystal field calculations", Philosophical Magazine 90 (2010) 4569–4578.
- ³² M.G. Brik, I. Sildos, V. Kiisk, "Calculations of physical properties of pure and doped crystals: Ab initio and semi-empirical methods in application to $YAlO_3:Ce^{3+}$ and TiO_2 ", Journal of Luminescence 131 (2011) 396–403.
- ³³ M.G. Brik, I.V. Kityk, K. Ozga, A. Slezak, "Structural, electronic and optical properties of pure and Ni^{2+} -doped CdI_2 layered crystals as explored by ab initio and crystal field calculations", Physica B 406 (2011) 192–199.
- ³⁴ M.G. Brik, "First-principles calculations of structural, electronic, optical and elastic properties of magnesite $MgCO_3$ and calcite $CaCO_3$ ", Physica B 406 (2011) 1004–1012.
- ³⁵ M.G. Brik, N.M. Avram, C.-G. Ma, "First-principles calculations of structural, electronic, optical, elastic properties and microscopic crystal field effects in Rb_2CrF_6 ", Computational Materials Science 50 (2011) 2482–2487.
- ³⁶ M.G. Brik, "Electronic, optical and elastic properties of $CuXS_2$ ($X=Al, Ga, In$) and $AgGaS_2$ semiconductors from first-principles calculations", Physica Status Solidi C 8 (2011) 2582–2584.
- ³⁷ M.G. Brik, C.-G. Ma, "First-principles studies of the electronic and elastic properties of metal nitrides XN ($X = Sc, Ti, V, Cr, Zr, Nb$)", Computational Materials Science 51 (2012) 380–388.